

معادله شرودينجر :

تتضمن نظرية دي بروجلي عن انه جسيماً كتلته (m) ويتحرك بسرعة مدارها (v) يصاحبه انتشار موجي نظراً لكون سرعته بالمعادلة .

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

حيث λ هو ثابت بلانك و $p = mv$ هو الزخم لهذا الجسم أي $\lambda = \frac{h}{p}$.

انه المعنى الحقيقي لهذه النظرية هو انه الجسيمات الدقيقة (وغيرها الكثير منها) تتصرف أحياناً كموجات ، ولدراسة الخواص الموجية المصاحبة لجسم متحرك تحت تأثير قوة ولا بد من وجود معادله تصف كيفية انتشار هذه الموجات . وقد وضع شرودينجر هذه المعادله والتي عرفت باسمه و هي من الصيغ الموجية للجسم المتحرك بداله هي $\psi(x,t)$. مسماها بدالة الموجة . وتعتبر معادله شرودينجر أهم معادله في ميكانيك الكم وهي التي تفسر في الاكثر استعمالاً من الصيغ الاخرى التي وضعها كل من ديراك وهايزنبرغ .

تجلبية الحصول على معادله شرودينجر عبر طريقتين . الأولى هو استخدام المعادله الموجية المشتقة من قوانين الفيزياء الكلاسيكية بدلالة ان الطاقة الموجية للجسيمات الدقيقة التي تصاحبه دي بروجلي انه ابط انواع الموجات هي تلك الناتجة من تذبذب وترتبط بالترددية حيث يعطى طول الموجة بالمعادلة الآتية :

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}$$

حيث λ هو طول الموجة و k هو طول الموجة و n عدد المداخل التي تكون فيها موجة الجسيمات مساوية للصفر . ومن قوانين الفيزياء الكلاسيكية نعرف انه اذا كانت اجزاء الموجة المختلفة تتصف بالعلاقة

① $\psi = A \sin \left(2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T} \right) \right)$ (جم) حيث A ثابت يحدد سعة الموجة و ψ هي دالة تصف ما يتبعه الجسيم في تلك ما و لا هو التذبذب (أو التواتر) .

$$\text{انه المعادله (2) هي المعادله التفاضلية الآتية} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} A \sin \left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T} \right)$$

$$\text{أي أن} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi = 0 \quad \text{أو} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi$$

وهي المعادله التي لا تكون فيها الكميات المتغيرة مع الزمن (في كثير من الحالات) يمكن ان تكون المعادله الباقية (مكتافاً فاديروليس جزئياً) .

$$\text{②} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi = 0$$

ومما انت $\lambda = \frac{h}{p}$ اذ يمكن كتابة هذه المعادله على الشكل الآتي :

$$\text{③} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2 p^2}{h^2} \psi = 0$$

ومما انه الطاقة الكلية للمنظومة هي اكثر ما يهنا فزناً سواء نفوسه المعادله ③ بدلالة الطاقة الكلية $E = T + U$ (حيث E هو الطاقة الكلية و T الطاقة الحركية و U هي الطاقة الكامنة) .

$$\text{أي أن} \quad E = \frac{p^2}{2m} + U$$

$$\text{منه} \quad p^2 = (E - U) 2m$$

وبذلك تصبح المعادلة (3) مع التعويض $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2m}{h^2} (E-U) \psi = 0$

وبتقريبه $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ تصبح $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E-U) \psi = 0$ (4)

وهي ما نسميها بمعادلة شرودينجر لجسيم يتحرك في اتجاه واحد (x). من الواضح ان المعادلة (4) معادلة شرودينجر في ابعادها 1 مثلاً مقبولة للمعادلة (3) مع التعويض

(5) $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E-U) \psi = 0$

والطريقة التي بها اشتقاق معادلة شرودينجر من المفروضات العامة لميكانيك الكم عند نظم من ذراتها آلياً الكم انه معنى كونه \hat{H} هو دالة ذاتية للمؤثر \hat{H} هو انه يحقق المعادلة

$\hat{H}\psi(q) = E\psi(q)$

هنا ψ هي المتغير الذاتية. واذا كانت طاقة المنظومة هي ما يعينها الدراسة فانه يمكن

\hat{H} في هذه الحالة هو \hat{H} (الطاقة الكلية) أي ان

$\hat{H}\psi(q) = E\psi(q)$

نماداً اعتبرنا جسيماً كتلته m ما به طاقته الكلية $T = \frac{p^2}{2m}$ وطاقته الكامنة U

وتكون الطاقة الكلية هي $E = T + U = \frac{p^2}{2m} + U$

وبتقريب الدفع به لانه \hat{p} آلياً الكم. نجد ان

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U$

أي ان

$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi$

أي يمكن كتابته كالتالي

$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + (E-U) \psi = 0$

وهي نفس المعادلة (5) التي حصلنا عليها عند طريق ميكانيك الميكانيك الكلاسيكية

وكتطبيقات لفرض آلياً الكم ندرس جسيم يتحرك في مكانه ما (غير) في مسار واحد

لنعتبر جسيماً كتلته m يتحرك في الاتجاه x وليكن في موضع x في الموضع x

وليكن طول ضلع هذا الصندوق هو a وانه يوجد V داخل هذا الصندوق يساوي

هنا V خارج الصندوق يساوي 0 أي انه الجسيم حبيبي دائماً داخل

الصندوق هو ψ سينكس عند الحدود $x=0, x=a$. فإذا كانت طاقة الجسيم

الكلية هي E وطاقته الجهد هي $V=0$ داخل الصندوق و V خارج الصندوق. فانه

المعادلة الموجية (معادلة شرودينجر) لهذا الجسيم خارج الصندوق هو

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V)\psi = 0$$

أما إذا

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\psi = 0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\alpha^2 \psi$$

ملاحظة: هذه المعادلة لها $\psi = 0$ إذا لم يكن هناك دالة فاصلة لشدة ψ يمكن أن تكون فيه لزوجية إذا كانت متماثلة مرتين ومعنى أن $\psi = 0$ أنه افتتان وجود الجسيم خارج الصندوق يبارى هنا. حالته داخل الصندوق $V = 0$ أي أن

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \quad \alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{نصلي المعادلة على الشكل التالي}$$

وهذه المعادلة حدها حلول مقبولة وهو أي حل لدالة ψ يعطي نفس الدالة مضروبة في ثابت عند تماثلها مرتين وهذه الدوال هي من الدوال الثلاثة الآتية:
 $\sin \alpha x$ و $\cos \alpha x$ و $e^{\alpha x}$
 وسواء تأخذ من هذه الحلول المقبولة الحد

$$\psi = A \sin \alpha x \quad \text{مع الشروط الأدلية في هذه الحالة هي:}$$

$$\psi_0 = \psi_a = 0$$

$$\psi_0 = A \sin \alpha \cdot 0 = 0$$

$$\psi_a = A \sin \alpha a = 0$$

وبما أن ψ_a يكون الدالة ψ_a صافية للصفر يجب أن يكون $\alpha a = n\pi$ إذاً

$$\alpha = \frac{n\pi}{a}, \quad \alpha^2 = \frac{n^2\pi^2}{a^2}$$

وبالتالي نستطيع أن نضع مع دالة ذاتية (مماثلة) لتعود صالحة (n)

$$\psi_n = A \sin \frac{n\pi x}{a}$$

$$\alpha^2 = \frac{n^2\pi^2}{a^2} = \frac{2mE_n}{\hbar^2} \Rightarrow E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2}{8ma^2}$$

وبما أن $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ إذاً

لدينا دالة التامة A سوف نطعمها مضاعف الدالة الجبرية ψ وهي أن

$$\int_0^a \psi^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^a \psi^2 dx = \int_0^a A \sin \frac{n\pi x}{a} \cdot A \sin \frac{n\pi x}{a} dx =$$

$$= A^2 \int_0^a \left[\sin \frac{n\pi x}{a} \right]^2 dx = 1$$

سوف نستخدم القاعدة العامة في التكامل

$$\int_0^a \sin^2 bx dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4b} \sin(2bx) - 0$$

$$b = \frac{n\pi}{a}$$

$$\int_0^a \psi^2 dx = A^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{1}{4} \frac{a}{n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{a} \right]_0^a$$

$$= A^2 \left[\frac{a}{2} - \frac{1}{4} \frac{a}{n\pi} \sin 2n\pi \right]$$

وهناك من هذا النظام عند ما نؤول x الى a هو $\frac{a}{2}$ سيكون

$$1 = A^2 \frac{a}{2} \Rightarrow \frac{2}{a} = A^2 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

اذن قيمة الثابت المجهول

$$\psi_n = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi x}{a}$$

مترين

ما هو احتمال وجود جسيم في x في النطاق $x \rightarrow 0 \rightarrow \frac{1}{2}a$ ، $x = \frac{1}{2}a$ ، $x = 0$
 وذلك بالمسوية الثانية